

对差分法时程积分的反思*

钟万颢 朱建平

(大连理工大学工程力学研究所 大连 116023) (美国密西西比州立大学应用数学系)

摘 要

以往偏微分方程时间步的数值积分主要由有限差分法来执行, 然而当时间步长较大时会引起数值不稳定性。本文给出的单点精细积分法导出的显式积分格式可证明是无条件稳定的。就扩散方程与对流-扩散方程作出了本文方法与差分法导出的格式之间的对比。数值例题也表明了单点积分法的优越性。

关键词 有限差分法 时间步积分 数值稳定性

一、子域精细积分及有限差分积分的格式

偏微分方程的求解法大体上由有限差分法、有限元法、边界元法、谱方法等所主宰^[1]。对于抛物型与双曲型微分方程, 沿时间坐标的积分则主要由有限差分类的方法作出。然而, 将微分算子化简为差分带来了稳定性与精度的问题。

如标准的教材^[2]所述, 将偏微分方程化简并不必须对全部坐标都离散, 例如对于扩散方程

$$\partial u / \partial t = D \cdot \partial^2 u / \partial x^2 \quad (1.1)$$

其中 D 是一个常参数。对于均分的网格 $x_j = j \cdot \Delta x$, $j = 0, 1, \dots, J$, 在空间坐标离散后会导出常微分方程组

$$\dot{u}_j = [D / (\Delta x)^2] \cdot (u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}), \quad (j = 1, 2, \dots, J-1) \quad (1.2)$$

现在先对最简单的FTCS格式作出推导, 其离散的时间可表述为 $t_n = n \cdot \Delta t$, $n = 0, 1, \dots$; 将 t_n 处的 \dot{u}_j 取近似为

$$\dot{u}_j \simeq (u_j^{n+1} - u_j^n) / \Delta t \quad (1.3)$$

于是方程(1.2)导向了

$$u_j^{n+1} = u_j^n + [(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) / 2 - u_j^n] \cdot 2D\Delta t / (\Delta x)^2 \quad (1.4)$$

这就是熟知的对方程(1.1)的有限差分FTCS格式, 它的稳定性条件为

$$2D\Delta t / (\Delta x)^2 < 1 \quad (1.5)$$

方程(1.2)可用另外的方法求解, 将它写成为

* 1995年1月10日收到。

部分由国家自然科学基金资助

$$\dot{u}_j + [2D/(\Delta x)^2] \cdot u_j = [D/(\Delta x)^2] \cdot (u_{j+1} + u_{j-1}) \quad (1.2)$$

只要将在右端的 u_{j+1} 及 u_{j-1} 当成为 u_{j+1}^* 及 u_{j-1}^* , 于是单点子域精细积分^[3]给出格式

$$u_j^{*+1} = [u_j^* - (u_{j+1}^* + u_{j-1}^*)/2] \cdot \exp[-2D\Delta t/(\Delta x)^2] + (u_{j+1}^* + u_{j-1}^*)/2 \quad (1.6)$$

用 von Neumann 法^[1]检验其数值稳定性给出条件

$$|\lambda + (1 - \lambda) \cos(k\Delta x)| \leq 1, \quad \lambda = \exp[-2D\Delta t/(\Delta x)^2] \quad (1.7)$$

其中 k 是一个任意的实参数。由于条件

$$0 \leq \lambda \leq 1 \quad (1.8)$$

当 $\Delta t > 0$ 及 $|\cos(k\Delta x)| \leq 1$ 时总能满足, 于是条件(1.7)总是成立。这样, 格式(1.6)是无条件稳定的。

现要讲明格式(1.6)与(1.4)之间的关系, 如将近似式

$$\lambda = \exp(-\xi) \simeq 1 - \xi, \quad \text{其中 } \xi = 2D\Delta t/(\Delta x)^2 \quad (1.9)$$

代入方程(1.6), 立即便得到格式(1.4)。稳定性条件(1.5)就是 $\xi \leq 1$, 就如条件(1.8)所要求的那样。这样, 有限差分的 FTCS 格式相应于近似(1.9), 正是它当 $\xi > 1$ 时引起了数值不稳定性, 而这是不必要的。

看得更清楚些, 容易观察到, 有限差分的 FTCS 格式(1.4)相应于在积分方程(1.2)时将其右端的 u_j , u_{j+1} 与 u_{j-1} 当成为 u_j^* , u_{j+1}^* 与 u_{j-1}^* , 其中对于 u_j 的近似是不必要的。

也许会感到 λ 要作指数函数的计算不方便。对此可作有理式的简化

$$\lambda = \exp(-\xi) = 1/\exp(\xi) \simeq (1 + \xi + \xi^2/2)^{-1} \quad (1.10)$$

它仍能满足条件(1.8), 从而保证了无条件稳定性, 因此仍比有限差分的 FTCS 格式好。

这个性质表明可以采用显式格式。虽然也可以推导出类同于 Crank-Nicholson 型的隐式格式, 但看来并无必要。不同的 FTCS 格式之间的仅有差别只在于参数 λ , 显式格式更为方便而有效, 因此下文将主要考虑显式格式。

两个 FTCS 格式(1.4)与(1.6)皆为 Δt 的一阶精度, 因此还应当寻求较好的格式。蛙跳积分格式具有二次精度, 然而对于差分法导出的蛙跳格式

$$u_j^{*+1} = u_j^{*-1} + (4D\Delta t/\Delta x^2) \cdot [u_{j-1}^* - 2u_j^* + u_{j+1}^*] \quad (1.11)$$

运用 von Neumann 法检验的结果表明它是无条件不稳定的。而单点子域精细积分给出的蛙跳格式为

$$u_j^{*+1} = [u_j^{*-1} - (u_{j+1}^* + u_{j-1}^*)/2] \cdot \exp[-4D\Delta t/(\Delta x)^2] + (u_{j+1}^* + u_{j-1}^*)/2 \quad (1.12)$$

von Neumann 法导出其稳定性条件为

$$|(1 - \lambda^2) \cos(k\Delta x) \pm [(1 - \lambda^2)^2 \cos^2(k\Delta x) + 4\lambda^2]^{1/2}| \leq 2$$

由于条件

$$0 < \lambda^2 = \exp[-4D\Delta t/(\Delta x)^2] \leq 1 \quad (1.13)$$

总是成立, 因此可证明格式(1.12)仍为无条件稳定。

为了做出简化, 可用(1.10)的近似, 或者采用

$$\lambda^2 \simeq (1 - \xi)/(1 + \xi), \quad \xi = 2D\Delta t/(\Delta x)^2 \quad (1.14)$$

这二个近似都给出无条件稳定的格式。

蛙跳格式将格点划分为二个组, 即 $(n+j)$ 为奇数与 $(n+j)$ 为偶数的组, 它们相互间没有关系^[1], 其改善可见下节。

对于多维问题的推广是很容易的。

二、对流—扩散方程

应用中十分关心对流—扩散方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - V \cdot \frac{\partial u}{\partial x} \quad (2.1)$$

的求解。该方程改进的指数型离散方案可如下推导。方程(2.1)有二个显然的解，即 $u = \text{常数}$ 及 $u = x - V \cdot t$ ，因此离散而得的方程应当为

$$\dot{u}_j = C_1 \cdot u_{j-1} - C_2 \cdot u_j + C_3 \cdot u_{j+1}, \quad (j = 1, 2, \dots, J-1) \quad (2.2)$$

$$\left. \begin{aligned} C_1 &= (V/2 + C_d) / \Delta x_j, & C_3 &= (-V/2 + C_d) / \Delta x_{j+1}, & C_2 &= (C_1 + C_3) \\ \Delta x_j &= x_j - x_{j-1}, & \Delta x_{j+1} &= x_{j+1} - x_j \end{aligned} \right\} \quad (2.3)$$

其中， $\Delta x_j, j = 1, 2, \dots, J$ 可以不均匀地分布。方程(2.1)的第三个解是指数函数

$$u = \exp[Vx/D]$$

由此可导出

$$\left. \begin{aligned} P_j &= V \cdot \Delta x_j / D, & P_{j+1} &= V \cdot \Delta x_{j+1} / D \\ F_j &= [1 - \exp(-P_j)] / \Delta x_j, & F_{j+1} &= [\exp(P_{j+1}) - 1] / \Delta x_{j+1} \\ C_d &= (V/2) \cdot (F_{j+1} + F_j) / (F_{j+1} - F_j) \end{aligned} \right\} \quad (2.4)$$

这样导出的离散方程(2.2)是上风的，因为 $C_1 > C_3 > 0$ ，并且可以由上一节的方法求解。子域精细积分蛙跳格式导得为

$$u_j^{n+1} = [u_j^{n-1} - (C_3 u_{j+1}^n + C_1 u_{j-1}^n) / C_2] \cdot \lambda^2 + (C_3 u_{j+1}^n + C_1 u_{j-1}^n) / C_2 \quad (2.5)$$

$$\lambda = \exp(-C_2 \Delta t) \quad (2.6)$$

它具有二阶 $(\Delta t)^2$ 的精度。注意到Crank-Nicholson格式也是二阶精度的。von Neumann法再一次验证了该格式为无条件稳定的，其证明在附录中给出。

有限差分的蛙跳格式对方程(2.2)可导出

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + 2 \cdot \Delta t \cdot [(C_3 u_{j+1}^n + C_1 u_{j-1}^n) - C_2 u_j^n]$$

这是不能用的，因为它无条件不稳定。

然而如上一节所述，蛙跳格式将格点划分成了二组互不相关的组合。对这问题的治理可以采用下文给出的高精度积分格式方程(2.13)'，或者在执行方程(2.5)的同时采用一个平均措施，叙述如下。注意在推导方程(2.5)时，同时有

$$(u_j^n)_2 = [u_j^{n-1} - (C_3 u_{j+1}^n + C_1 u_{j-1}^n) / C_2] \cdot \lambda + (C_3 u_{j+1}^n + C_1 u_{j-1}^n) / C_2 \quad (2.7)$$

它与上一次所得(中间值)的 u_j^n 不同。平均值有如

$$(u_j^n)_a = \alpha \cdot u_j^n + (1 - \alpha) \cdot (u_j^n)_2 \quad (2.8)$$

其中， α 是待选择的参数，可以用来代替 u_j^n 。这样，在执行方程(2.5)的积分时，其中 t_{n-1} 时的 u^{n-1} 的值是在前一个时间步由方程(2.8)的平均算得的；函数值 u^n 是中间值，是前一个时间步所算得的，并且还要由方程(2.8)作平均以给出其最终的值；在 t_{n+1} 时的 u^{n+1} 由方程(2.5)给出，它是中间值，在下一个时间步积分中要用到。参数 α 可选择为 $\alpha = \lambda$ ，这样可保持积分格式为二阶精度。

必要时也可采用(1.14)的近似以免除计算指数函数。

为了便于比较，列出FTCS的积分格式

$$u_j^{n+1} = [u_j^n - (C_3 u_{j+1}^n + C_1 u_{j-1}^n) / C_2] \cdot \lambda + (C_3 u_{j+1}^n + C_1 u_{j-1}^n) / C_2 \quad (2.9)$$

它只有一阶精度,因此数值精度并不很好,然其计算工作量却与蛙跳格式的方程(2.5)及(2.6)相当。

二阶精度的蛙跳格式还可进一步改善,方程(2.2)可近似为

$$\begin{aligned} \dot{u}_j + C_2 u_j = C_1 u_{j-1}^n + C_3 u_{j+1}^n + (C_1 \dot{u}_{j-1}^n + C_3 \dot{u}_{j+1}^n) \cdot (t - t_n) \\ + (C_1 u_{j-1}^n + C_3 u_{j+1}^n) \cdot (t - t_n)^2 / 2, \quad (j=1, 2, \dots, J-1) \end{aligned} \quad (2.10)$$

再利用方程(2.2)可导出

$$\dot{u}_i^n = C_1 u_{i-1}^n - 2C_2 u_i^n + C_3 u_{i+1}^n, \quad (i=j-1, j+1) \quad (2.11)$$

及

$$u_i^n \approx 2 \cdot [\dot{u}_i^n - (u_i^n - u_i^{n-1}) / \Delta t] / \Delta t \quad (2.12)$$

对方程(2.10)自 t_{n-1} 至 t_{n+1} 积分,有

$$\begin{aligned} u_i^{n+1} = [u_i^{n-1} - (C_3 u_{i+1}^n + C_1 u_{i-1}^n) / C_2] \cdot \lambda^2 + (C_3 u_{i+1}^n + C_1 u_{i-1}^n) / C_2 \\ + [(C_1 \dot{u}_{i-1}^n + C_3 \dot{u}_{i+1}^n) / C_2] \cdot [(1 - 1/\xi) + (1 + 1/\xi) \cdot \lambda^2] \cdot \Delta t \\ + [(C_1 u_{i-1}^n + C_3 u_{i+1}^n) / C_2] \cdot [0.5 + (1/\xi - 1) / \xi] \\ - [0.5 + (1/\xi + 1) / \xi] \cdot \lambda^2 \cdot (\Delta t)^2 \end{aligned} \quad (2.13)$$

其中 $\xi = C_2 \cdot \Delta t$, $\lambda^2 = \exp(-2\xi)$

显式格式(2.13)具有4阶精度,然而当 $\xi > 1$ 时它有不稳定的问题.该问题是采用了Taylor展开式近似(2.10)而引起的.可以用一个措施治理该问题如下.引入参数

$$r = 1.5 / (1 + \xi^2 / 2), \quad \text{当 } \xi > 1 \text{ 时, 否则 } r = 1$$

并将格式修改为

$$\begin{aligned} u_i^{n+1} = [u_i^{n-1} - (C_3 u_{i+1}^n + C_1 u_{i-1}^n) / C_2] \cdot \lambda^2 + (C_3 u_{i+1}^n + C_1 u_{i-1}^n) / C_2 \\ + [(C_1 \dot{u}_{i-1}^n + C_3 \dot{u}_{i+1}^n) / C_2] \cdot [(1 - 1/\xi) + (1 + 1/\xi) \cdot \lambda^2] \cdot (r \cdot \Delta t) \\ + [(C_1 u_{i-1}^n + C_3 u_{i+1}^n) / C_2] \cdot [0.5 + (1/\xi - 1) / \xi] \\ - [0.5 + (1/\xi + 1) / \xi] \cdot \lambda^2 \cdot (r \cdot \Delta t)^2. \end{aligned} \quad (2.13)'$$

这就给出了稳定的结果.这个格式并无纯蛙跳格式的将格点划分为二组的问题.

数值结果表明了当前方法的有效性.取 $D=1$, $V=14$, 区域 $0 \leq x \leq 2$; 边界条件取为

$$u=0, \quad \text{当 } x=0; \quad u=20, \quad \text{当 } x=2.0; \quad \text{及 } u=10 \cdot x, \quad \text{当 } t=0$$

不等长的 $J=20$ 区间的节点坐标为

$$\begin{aligned} x=0.0; 0.05; 0.10; 0.15; 0.20; 0.30; 0.40; 0.50; 0.60; 0.80; 1.0; \\ 1.20; 1.40; 1.50; 1.60; 1.70; 1.80; 1.85; 1.90; 1.95; 2.0. \end{aligned}$$

半离散的方程由方程(2.2)~(2.4)给出.由方程(2.5)~(2.8)及方程(2.9)分别作出逐步积分计算,步长为 $\Delta t=0.0010$.数值结果在图1中分别用 \circ 及 \times 标记,而实线则由全域精细积分^[4,5]的结果做出,这就是半离散常微分方程组(2.2)的精确解.蛙跳格式方程(2.5)~(2.8)给出的结果已经是很好的了.

四阶精度的单点积分格式(2.13)'对于时间步长 $\Delta t=0.001$ 给出了非常精密的解,其数值结果与精确解有3位有效数字相符,因此已不能在图1中区分出来.

对于多维问题的推广是很容易办到的.

三、讨论与结语

由精细积分可导出无条件稳定的显式格式说明,进一步的研究是值得的.与有限差分格式对应的近似(1.9)与方程(1.10)相比显得非常粗糙,其计算工作量几乎相同而后者是无条

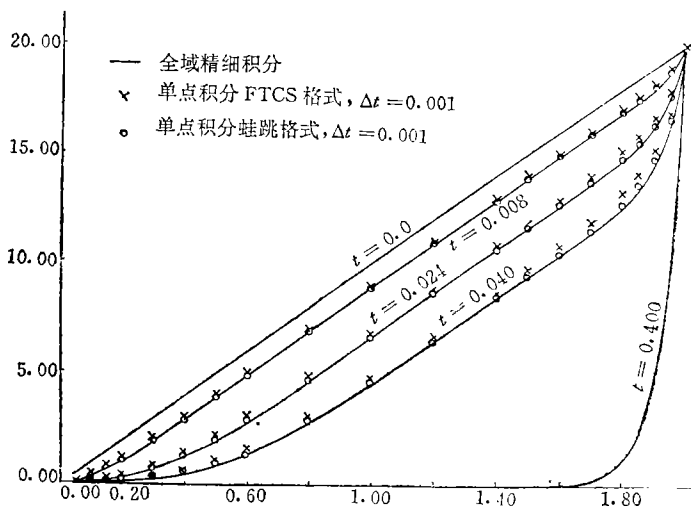


图1 数值例题的结果

件稳定的。尤其，子域积分的蛙跳格式有二阶精度且无条件稳定，而有限差分蛙跳格式却不能用。注意到Crank-Nicholson格式也是二阶精度但它是隐式的，因此会耗费更多的计算工作。

离散的对流-扩散方程(2.2)仍可由子域积分法求解。其显式蛙跳格式仍为无条件稳定并给出了满意的结果。再者，高精度子域积分可达到四阶精度。

结论是，有限差分时间积分比起子域精细积分来不很理想，进一步探讨无疑是必要的。

鸣谢 本文部分由自然科学基金支持。感谢香港大学土木系的帮助使本文得以在94年12月的COMSAGE会上报告。

附录：格式(2.5)的稳定性证明

运用von Neumann法，令 $u_j^n = \eta^n \exp(ikx_j)$ 再代入(2.5)式，得到对于 η 的一个二次方程

$$\eta = \lambda \eta^{-1} + (1-\lambda) \cdot \beta, \quad \beta = (C_3/C_2) \exp(ik\Delta x_{j+1}) + (C_1/C_2) \exp(-ik\Delta x_j) \quad (\text{A.1})$$

利用方程(2.3)可证得 $|\beta| \leq 1$ 。方程(A.1)的二个根 η_1 与 η_2 应当有

$$\eta_1 \cdot \eta_2 = -\lambda, \quad \eta_1 + \eta_2 = (1-\lambda) \cdot \beta \quad 0 < \lambda \leq 1 \quad (\text{A.2})$$

令 $\eta_1 = r_1 e^{i\theta}$, $\eta_2 = -r_2 e^{-i\theta}$ ，其中 $r_1 > 0$, $r_2 > 0$ 且

$$r_1 \cdot r_2 = \lambda, \quad (r_1 - r_2) \cos \theta + i(r_1 + r_2) \sin \theta = (1-\lambda) \cdot \beta \quad (\text{A.3})$$

将(A.3)后一个方程取绝对值的平方，有

$$r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos 2\theta = (1-\lambda)^2 |\beta|^2$$

再与(A.3)的第1式相组合有

$$(r_1 + r_2)^2 = (1-\lambda)^2 |\beta|^2 + 2\lambda \cdot (1 + \cos 2\theta) \leq (1-\lambda)^2 + 4\lambda = (1+\lambda)^2 \quad (\text{A.4})$$

再一次与(A.3)的第1式相组合，有

$$(r_i - \lambda) \cdot (r_i - 1) \leq 0, \quad (i=1,2)$$

这表明 $\lambda \leq r_i \leq 1$ 。因此知格式(2.5)是无条件稳定的。

参 考 文 献

- [1] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C*, 2nd ed., Cambridge Univ. Press (1992).
- [2] O. C. Zienkiewicz and R. L. Taylor, *The Finite Element Method*, 4th ed., McGraw-Hill, NY (1991).
- [3] 钟万颢, 子域精细积分及偏微分方程数值解, 计算结构力学及应用 (待发表).
- [4] 钟万颢等, 《计算结构力学与最优控制》, 大连理工大学出版社 (1993).
- [5] W. X. Zhong and F. W. Williams, A precise time step integration method, *Proc. Instn. Mech. Engrs.*, 208 (1994).

Rethinking to Finite Difference Time-Step Integrations

Zhong Wanxie

(*Research Institute of Engineering Mechanics, Dalian University of Technology, Dalian 116023, P. R. China*)

Zhu Jianping

(*Dept. Appl. Math., Mississippi State Univ., U. S. A.*)

Abstract

The numerical time step integrations of PDEs are mainly carried out by the finite difference method to date. However, when the time step becomes longer, it causes the problem of numerical instability. The explicit integration schemes derived by the single point precise integration method given in this paper are proved unconditionally stable. Comparisons between the schemes derived by the finite difference method and the schemes by the method employed in the present paper are made for diffusion and convective-diffusion equations. Numerical examples show the superiority of the single point integration method.

Key words finite difference method, time step integration, numerical stability